無制約最適化問題に対する新しい3項共役勾配法について (計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺)

成島, 康史; 矢部, 博

数理解析研究所講究録
第 1614 巻 2008 年 144-155

A new three-term nonlinear conjugate gradient method for unconstrained optimization

Department of Mathematical Information Science,
Tokyo University of Science
Yasushi Narushima
and
Hiroshi Yabe

Abstract: Conjugate gradient methods are appealing for large scale nonlinear optimization problems, because they avoid the storage of matrices. In this paper, we propose a new three-term conjugate gradient method which always generates a sufficient descent direction. We give a sufficient condition for the global convergence of the proposed method within the line search strategy. Moreover, we make a concrete choice of parameters contained in the proposed method, and establish its global convergence. Finally, some numerical results of the proposed method are reported.

無制約最適化問題に対する新しい3項共役勾配法について

東京理科大学・数理情報科学科　成島　康史
東京理科大学・数理情報科学科　矢部　博

概要: 近年, 大規模な無制約最適化問題に対する数値解法として共役勾配法が注目されている. しかしながら, 共役勾配法は一般的には降下方向を生成することは保証されていない. 本稿では, 常に降下方向を生成する新しい 3 項共役勾配法を提案する. さらに提案した 3 項共役勾配法が大域的に解に収束するための十分条件を与える. また, 3 項共役勾配法に含まれるパラメータの具体的な選択法を提案し, それを用いた方法の大域的収束性を議論する. 最後に数値実験において, 既存の方法と比較を行い提案した解法の有効性を検証する.

1 はじめに

次の無制約最小化問題を考える.

$$\text{minimize} \quad f(x) \tag{1.1}$$

ただし, $f : \boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}$ は滑らかな関数とし, その勾配ベクトル $\nabla f(x)$ は利用可能であるとする. 問題 (1.1) を解くために反復法が広く使われており, その反復式は

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \tag{1.2}$$

によって与えられる. ここで, $\alpha_k > 0$ はステップ幅, $d_k \in \boldsymbol{R}^n$ は探索方向と呼ばれる. 以下では簡単のために, $g(x) \equiv \nabla f(x)$ とし, $g_k \equiv g(x_k)$ と表こととする.

探索方向 d_k の選択によって様々な方法が提案されており，中でも有効な方法として準ニュートン法がよく知られている．しかしながら，行列の保存が必要なため，大規模な問題に対して準ニュートン法の適応が困難になる．そのため近年では，共役勾配法，記憶制限準ニュートン法などの行列を利用しない方法が注目を集めている．

共役勾配法の探索方向は

$$d_k = \begin{cases} -g_k, & \text{for} \quad k=0, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1} & \text{for} \quad k \geq 1 \end{cases} \tag{1.3}$$

によって与えられる．通常，パラメータ β_k は目的関数が狭義凸 2 次関数で直線探索が正確な場合には線形共役勾配法に帰着されるように選ばれる．線形共役勾配法では β_k は一意に定まるが，非線形共役勾配法の場合には，パラメータ β_k の選び方によっていろいろな種類の共役勾配法が提案されている．よく知られた方法として Hestenes-Stiefel (HS) [9], Fletcher-Reeves (FR) [4], Polak-Ribière (PR) [13], Polak-Ribière Plus (PR+) [6], Dai-Yuan (DY) [3] などの方法があり，β_k はそれぞれ

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}, \tag{1.4}$$

$$\beta_k^{FR} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}, \tag{1.5}$$

$$\beta_k^{PR} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \tag{1.6}$$

$$\beta_k^{PR+} = \max\left\{0, \ \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}\right\}, \tag{1.7}$$

$$\beta_k^{DY} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T y_{k-1}}. \tag{1.8}$$

によって与えられる．ただし，

$$y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$$

とし，$\|\cdot\|$ は ℓ_2 ノルムとする．これらの方法は，それぞれ大域的収束性が議論されており，例えば，Zoutendijk [19] は正確な直線探索を用いた場合の FR 法の大域的収束性を議論し，Al-Baali [1] はその結果を正確でない直線探索を用いた場合に拡張している．一方，Powell [14] は PR 法，及び HS 法が収束せずに循環してしまう例を紹介している．その後，Gilbert and Nocedal [6] は PR+法の大域的収束性を証明した．近年では，セカント条件に基づいて修正された共役性条件を用いた研究も行われており，いくつかの方法が提案されている [2, 5, 16]．そのほかにも様々な種類の共役勾配法が提案されており，それらは Hager and Zhang [8] によってまとめられている．

共役勾配法においては，探索方向が十分な降下方向であることが望ましい．探索方向が十分な降下方向であるとは，ある正定数 $\bar{c}$ が存在して，すべての k に対して

$$g_k^T d_k \leq -\bar{c}\|g_k\|^2 \tag{1.9}$$

が成立することを意味する．共役勾配法において正確な直線探索が使用された場合，$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$ となるため，探索方向は β_k の選択に関係なく十分な降下方向を生成する．しかし通常は，正確な直線探索は手間がかかりすぎるため，正確でない直線探索が使用される．そのため一般的には，共役勾配法は常に十分な降下方向を生成するとは限らない．この欠点を解消するため，いくつかの研究が行われている．例えば，Yabe and Sakaiwa [15] は直線探索において強い Wolfe 条件を満たすステップ幅が選択された場合に十分な降下方向を生成する共役勾配法を提案した．また，Hager and Zhang [7] は直線探索において Wolfe 条件を満たすステップ幅が選択された場合に十分な降下方向を生成する共役勾配法を提案している．一方，3 項共役勾配法も研究されており，Zhang ら [17, 18] は従来の共役勾配法 (FR 法 [17]，及び PR 法 [18]) の探索方向に補正項を加え 3 項とすることで，直線探索に依存せずに，常に十分な降下方向を生成する 3 項共役勾配法を提案した．さらに Zhang らは，直線探索において修正された Armijo 条件を用いたアルゴリズムの大域的収束性を証明している．

本論文では，直線探索や β_k の選び方に依存せずに常に十分な降下方向を生成する 3 項共役勾配法を提案し，その大域的収束性を議論する．

2 新しい 3 項共役勾配法とその収束性

本節では，次の 3 項共役勾配法を提案する：

$$d_k = \begin{cases} -g_k & k = 0, \\ -g_k + \beta_k (g_k^T p_k)^\dagger \{(g_k^T p_k) d_{k-1} - (g_k^T d_{k-1}) p_k\} & k \geq 1, \end{cases} \tag{2.10}$$

ただし，$\beta_k \in \mathbf{R}$ はパラメータ，$p_k \in \boldsymbol{R}^n$ は任意ベクトルであり，さらに $\dagger$ を

$$a^\dagger = \begin{cases} \dfrac{1}{a} & a \neq 0, \\ 0 & a = 0 \end{cases}$$

で定義する．ここで，すべての k に対して

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2 < 0 \tag{2.11}$$

が成立するので，(2.10) は β_k の選択に関係なく常に十分な降下方向を生成する．また，正確な直線探索が行われ，かつ $g_k^T p_k \neq 0$ の場合，3 項共役勾配法 (2.10) は通常の共役勾配法 (1.3) に帰着される．さらに $g_k^T p_k \neq 0$ の場合，(2.10) は

$$d_k = -g_k + \beta_k \left(I - \frac{p_k g_k^T}{g_k^T p_k} \right) d_{k-1} \tag{2.12}$$

と表現できる．ここで，$(I - p_k g_k^T / g_k^T p_k)$ は $\mathrm{Span}\{p_k\}$ に沿った $\mathrm{Span}\{g_k\}$ の直交補空間への射影行列であるため，提案した 3 項共役勾配法は d_{k-1} を $\mathrm{Span}\{g_k\}$ の直交補空間に射影したベクトルを使用した方法であると解釈できる．

ここで $\beta_k = \beta_k^{FR}$, $p_k = g_k$ とおくと, 3 項共役勾配法 (2.10) は Zhang ら [18] の方法に帰着される. さらに, $\beta_k = \beta_k^{PR}$, $p_k = y_{k-1}$ とすると, $g_k^T y_{k-1} \neq 0$ の場合には, 3 項共役勾配法 (2.10) は Zhang ら [17] の方法に帰着される.

次に, 直線探索において強い Wolfe 条件を使用した 3 項共役勾配法のアルゴリズムを考える.

アルゴリズム 2.1 (3T-CG)

Step 0. 初期点 x_0, 初期探索方向 $d_0 = -g_0$ 及びパラメータ δ, σ $(0 < \delta < \sigma < 1)$ を与える. $k = 0$ とおいて, *Step 2* へ進む.

Step 1. (2.10) により探索方向 d_k を計算する.

Step 2. 強い *Wolfe* 条件:

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq -\delta \alpha_k g_k^T d_k, \tag{2.13}$$

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \sigma |g_k^T d_k| \tag{2.14}$$

を満たすステップ幅 α_k を計算する.

Step 3. 点 x_k を (1.2) により更新し, 停止条件を満たしているならば終了する.

Step 4. $k \leftarrow k + 1$ として *Step 1* へ戻る. □

強い Wolfe 条件は共役勾配法の大域的収束性を保証するためによく用いられる条件で, 例えば Moré らの直線探索法 [11] などを使用することで, 強い Wolfe 条件を満たすステップ幅 α_k を見つけることができる.

次に提案したアルゴリズムの大域的収束性を示す. そのために, まず目的関数 f に以下の条件を課す.

仮定 2.1

1. 初期点における準位集合 $\mathcal{L} = \{x | f(x) \leq f(x_0)\}$ は有界である.

2. $\mathcal{L}$ の近傍 $\mathcal{N}$ において f は連続微分可能で, その勾配はリプシッツ連続である. すなわち

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(\bar{x})\| \leq L \|x - \bar{x}\| \quad (\forall x, \bar{x} \in \mathcal{N})$$

を満たす $L > 0$ が存在する. □

ここで, 大域的収束性の証明の準備のために $\|d_k\|$ の評価を行う. まず, $g_k^T p_k = 0$ の場合, $d_k = -g_k$ より

$$\|d_k\| = \|g_k\| \tag{2.15}$$

が成立する. 一方 $g_k^T p_k \neq 0$ の場合, (2.12), (2.11) 及び $\left\| I - \frac{p_k g_k^T}{g_k^T p_k} \right\| = \frac{\|g_k\| \|p_k\|}{|g_k^T p_k|}$ から

$$\|d_k\|^2 \leq \beta_k^2 \left(\frac{\|g_k\| \|p_k\|}{|g_k^T p_k|} \right)^2 \|d_{k-1}\|^2 + \|g_k\|^2 \tag{2.16}$$

を得る．したがって，

$$\psi_k = \beta_k \|g_k\| \|p_k\| (g_k^T p_k)^\dagger$$

とすると，(2.15) と (2.16) から，すべての k に対して

$$\|d_k\|^2 \leq \psi_k^2 \|d_{k-1}\|^2 + \|g_k\|^2$$

が成立する．

次に大域的収束性のための十分条件を与えるために，β_k，p_k に関する次の二つの性質を導入する．

性質 1
アルゴリズム *3T-CG*を考える．すべての k に対して $\varepsilon \leq \|g_k\|$ を満たす正定数 ε が存在すると仮定する．このとき，もし定数 $b > 1$ と $\xi > 0$ が存在して，すべての k に対して

$$\begin{aligned} |\psi_k| &\leq b, \\ \|s_{k-1}\| &\leq \xi \implies |\psi_k| \leq \frac{1}{b} \end{aligned}$$

が成り立つならば，アルゴリズム *3T-CG*は**性質 1**を満たすという． □

性質 2
性質 1 と同様の仮定が成り立っているとする．このとき，正定数 c が存在して，すべての k に対して

$$|\beta_k| \; \|p_k\| \; |g_k^T p_k|^\dagger < c$$

が成り立つならば，アルゴリズム *3T-CG*は**性質 2**を満たすという． □

ここで，アルゴリズム 3T-CG の大域的収束を示すために Zoutendijk [19] の補題，及びその系を紹介しておく．

補題 2.1
仮定 2.1 が成立しているとする．一般の反復法 (1.2) を考える．ただし d_k は降下方向で，α_k は *Wolfe*条件：

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) &\geq -\delta \alpha_k g_k^T d_k, \\ g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k &\geq \sigma g_k^T d_k \end{aligned}$$

を満たすものとする（ただし $0 < \delta < \sigma < 1$ とする）．このとき，

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty$$

が成立する． □

系 2.1
仮定 2.1 が成立しているとする．一般の反復法 (1.2) を考える．ただし d_k は十分な降下条件 (1.9) を満たし，α_k は *Wolfe* 条件を満たすものとする．このとき，もし

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\|d_k\|^2} = \infty$$

が成立するならば

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0$$

が成り立つ． □

この補題と系を利用することにより，大域的収束性の証明に必要ないくつかの補題を得ることができる．

補題 2.2
仮定 2.1 が成立しているとする．アルゴリズム *3T-CG* を考える．さらに，ある正の定数 ε が存在して，すべての k に対して $\varepsilon \le \|g_k\|$ が成立すると仮定する．このとき，もし性質 2 及び $\beta_k \ge 0$ が成立するならば，$d_k \ne 0$ かつ

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|u_k - u_{k-1}\|^2 < \infty$$

が成立する．ただし $u_k = d_k/\|d_k\|$ とする． □

ここで次の補題のために，k 回目の反復において，正の数 λ と自然数 Δ に依存した，以下ような添え字集合を定義する:

$$\mathcal{K}_{k,\Delta}^{\lambda} := \{i \in \boldsymbol{N} \mid k \le i \le k+\Delta-1,\ \|s_{i-1}\| > \lambda\}$$

ただし，$\boldsymbol{N}$ は自然数全体の集合とする．

補題 2.3
補題 2.2 のすべての仮定が成り立っているとする．このとき，もし，性質 1 が成立するならば，正定数 $\lambda > 0$ が存在して，すべての $\Delta \in \boldsymbol{N}$ と k_0 に対して，

$$|\mathcal{K}_{k,\Delta}^{\lambda}| > \frac{\Delta}{2}$$

が成立するような k $(k \ge k_0)$ が存在する． □

以上の補題，及び系を利用して以下の大域的収束性の定理を得ることができる．

定理 2.1
仮定 2.1 が成立しているとする．このとき，以下の 2 条件：

(C1) すべての k に対して $\beta_k \ge 0$ が成立する，

(C2) 性質 1 及び 性質 2 が成立する

を満たすアルゴリズム *3T-CG* によって生成される点列 $\{x_k\}$ は

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0$$

の意味で大域的に収束する. □

上の定理は2つの条件 (C1), (C2) を満たす任意の3項共役勾配法に対する大域的収束性を述べている. 例えば, この定理を利用することにより, 次の系を得ることができる.

系 2.2
仮定 2.1 が成立しているとする. このとき

Case 1 . $\beta_k = \beta_k^{PR+} = \max\left\{0,\ \dfrac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}\right\}$ かつ $p_k = y_{k-1}$,

Case 2 . $\beta_k = \beta_k^{HS+} = \max\left\{0,\ \dfrac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}\right\}$ かつ $p_k = y_{k-1}$

のどちらかを用いたアルゴリズム *3T-CG* によって生成される点列 $\{x_k\}$ は

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0$$

の意味で大域的に収束する. □

ここで, この系 2.2 も新しい結果であることを注意しておく.

3　新しい β_k 及び p_k の提案

本節では, $d_k \in \mathrm{Span}\{-g_k,\ s_{k-1},\ s_{k-2}\}$ となるような新しい3項の共役勾配法を提案する. ただし

$$s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$$

とする. そのために探索方向 d_k を

$$d_k = -g_k + \widehat{\beta}_k \widehat{r}_{k-1},$$
$$\widehat{r}_{k-1} = s_{k-1} - \widehat{\phi}_k s_{k-2}$$

と定義する. ここで, 探索方向 d_k が強い降下条件 (2.11) を満たすような $\widehat{\phi}_k$ を考えると

$$\widehat{\phi}_k = \frac{g_k^T s_{k-1}}{g_k^T s_{k-2}}$$

となる. さらに β_k を決定するため探索方向 d_k に以下の条件を課す:

$$d_k^T \widehat{w}_{k-1} = 0. \tag{3.17}$$

ただし, t_k を非負のパラメータとし,

$$\widehat{w}_{k-1} = y_{k-1} - t_k \widehat{\phi}_k y_{k-2}$$

とする．ここで，条件 (3.17) は拡張された共役性条件であることを注意しておく．特に，$t_k = 0$ とした場合は従来の共役性条件 $d_k^T y_{k-1} = 0$ に帰着される．条件 (3.17) を満たすように $\widehat{\beta}_k$ を計算すると

$$\widehat{\beta}_k = \frac{g_k^T \widehat{w}_{k-1}}{\widehat{r}_{k-1}^T \widehat{w}_{k-1}}$$

となる. ここで探索方向 d_k を s_{k-1}, s_{k-2} の代わりに d_{k-1}, d_{k-2} を用いて表すと

$$d_k \;=\; -g_k + \beta_k^{new} d_{k-1} - \beta_k^{new} \phi_k d_{k-2}, \tag{3.18}$$

と表現しなおすことができる. ただし

$$\begin{aligned} \phi_k &= \frac{g_k^T d_{k-1}}{g_k^T d_{k-2}}, && (3.19)\\ r_{k-1} &= d_{k-1} - \phi_k d_{k-2}, && (3.20)\\ w_{k-1} &= y_{k-1} - t_k \frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_{k-2}} \phi_k y_{k-2}, && (3.21)\\ \beta_k^{new} &= \frac{g_k^T w_{k-1}}{r_{k-1}^T w_{k-1}} \end{aligned}$$

である. これは (2.10) において $p_k = d_{k-2}$, $\beta_k = \beta_k^{new}$ とした 3 項共役勾配法である. ここで, この新しい 3 項共役勾配法は, 正確な直線探索が使用された場合には通常の共役勾配法 (HS 法) に帰着されることを注意しておく.

さらに, 大域的収束性を保証するために

$$\beta_k^{new+} = \max\left\{ \frac{g_k^T w_{k-1}}{r_{k-1}^T w_{k-1}},\ 0 \right\}. \tag{3.22}$$

と修正した 3 項の共役勾配法を提案する.

次に，提案した 3 項共役勾配法の大域的収束性を証明するために，以下のような仮定を追加する.

仮定 3.1

1. 正の定数 τ_1, τ_2 が存在し, すべての k に対して

$$\begin{aligned} |g_k^T d_{k-2}| &\geq \tau_1 \|g_k\|. \\ |g_{k-1}^T r_{k-1}| &\geq \tau_2 |g_{k-1}^T d_{k-1}|. \end{aligned}$$

が成立する.

2. 非負の定数 τ_3 $(0 \le \tau_3 < 1)$ が存在し, すべての k に対して

$$t_k \frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_{k-2}} |\phi_k| \le \tau_3 \min \left\{ \left| \frac{g_k^T y_{k-1}}{g_k^T y_{k-2}} \right|, \ \left| \frac{r_{k-1}^T y_{k-1}}{r_{k-1}^T y_{k-2}} \right| \right\}.$$

が成立する. □

この仮定の下で, 定理 2.1 を利用することにより以下の定理を得る.

定理 3.1
仮定 2.1, 及び 3.1 が成立しているとする. $\beta_k = \beta_k^{new+}$ かつ $p_k = d_{k-2}$ としたアルゴリズム *3T-CG* によって生成される点列 $\{x_k\}$ は

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0$$

の意味で大域的に収束する. □

4 数値実験

本節では, 提案した解法の有効性を検証するために予備的な数値実験結果を報告する. 実験した解法は以下のとおりである.

- L-BFGS: 記憶制限準ニュートン法 (記憶数 5) ([13] 参照)
- 共役勾配法
  HS: Hestenes-Stiefel 法 (1.4)
  PR+: Polak-Ribiére Plus 法 (1.7)
- 3 項共役勾配法
  3HS+: $\beta_k = \beta_k^{HS+}$, $p_k = y_{k-1}$ (系 2.2 参照)
  3PR+: $\beta_k = \beta_k^{PR+}$, $p_k = y_{k-1}$ (系 2.2 参照)
  New+: $\beta_k = \beta_k^{new+}$, $p_k = d_{k-2}$, $t_k = 1$ ((3.18)–(3.22) 参照)

テスト関数は Moré et al. [10] から

No.	問題名	次元
1	Extended Rosenbrock function	500000
2	Extended Powell singular function	200000
3	Trigonometric function	200000

を選択した.

直線探索においては Moré らの直線探索法 [11, 12] を利用し, ステップ幅 α_k が $\delta = 0000.1$, $\sigma = 0.1$ とした強い Wolfe 条件 (2.13), (2.14) を満たすように選択された. ただし, Moré の直線探索法を使用して収束しなかった問題に対しては, 2 次補間法を利用し, ステップ幅 α_k が Armijo 条件 (2.13) を満たすように直線探索を行った. また, 終了判定条件を

$$\|g_k\| \le 10^{-5}.$$

とした.

表 1, 2 では数値実験結果を「反復回数/関数評価回数, 実行時間 (秒)」の形式で表している (ただし実行時間は 2 段目に記載). また, 問題 P3 において $*$ が付いているのは直線探索で 2 次補間法と Armijo 条件 (2.13) を利用したことを意味している. 表 1 では Moré ら [10] によって推奨されている初期点を使用したときの結果が記載されている. また表 2 では 20 個の初期点をランダムに発生させて実験を行った時の 20 回の結果の合計を記載している. なお, 表 2 では L-BFGS 法は時間がかかりすぎたため表から削除した.

表 1, 2 から今回提案した 3 項共役勾配法 (3HS+, 3PR+, New+) は非常に有効であることが確認できる. 全体の実行時間の点からみると, 3 項共役勾配法は通常の共役勾配法の 5 割〜6 割程度の実行時間で済んでいることがわかる. 特に表 1, 2 から, 3 項共役勾配法は通常の共役勾配法に比べ, 問題 P2 に対して有効であるように思われる. 通常の共役勾配法は, 問題 P2 のように解においてヘッセ行列が非正則であるような問題に対しては, 極端に効率が悪くなることが多い. 一方, 表 1 では, 3 項共役勾配法は L-BFGS と同程度の時間で収束している.

また, 3 項共役勾配法どうしを比べると, 表 1 では 3HS+が一番よく, New+もほぼ同程度の実行時間で収束している. また, 表 2 では New+が最もよく, 3PR+もほぼ同程度の実行時間で収束している. このことから, 今回の実験においては, New+は他の方法と比べ有効であると考えることができるだろう.

表 1: 数値実験結果 1

P	L-BFGS	HS	PR+	3HS+	3PR+	New+
1	37/62	18/138	23/155	22/145	28/165	24/151
	24.118	**3.151**	3.635	4.119	4.633	4.196
2	61/81	146/421	208/593	52/194	79/282	68/236
	27.737	59.561	84.973	**25.677**	38.298	27.362
3*	135/1348	48/127	35/59	32/61	40/63	33/51
	78.811	7.659	4.524	4.618	5.241	**4.461**
実行時間 (合計)	130.666	70.371	93.132	**34.414**	48.172	36.019

表 2: 数値実験結果 2

P	HS	PR+	3HS+	3PR+	New+
1	419/1727	816/3406	387/1795	383/1720	426/1724
	6.242	12.061	7.738	7.550	8.364
2	4067/9786	6322/15501	2045/5728	1862/5473	2005/5269
	590.696	936.582	348.818	332.511	**324.043**
3*	440/480	940/1020	720/760	560/600	540/580
	21.917	48.329	41.435	30.666	29.096
実行時間 (合計)	618.855	996.972	397.991	370.727	**361.503**

5 まとめ

本論文では, 直線探索などに依存せずに常に十分な降下方向を生成する 3 項共役勾配法を提案し, その大域的収束性のための十分条件を与えた. さらに, 提案した 3 項共役勾配法のパラメータ β_k, 及びベクトル p_k の新しい選択法を提案し, その大域的収束性を議論した. また, 数値実験において既存の方法と比較し, 提案した解法の有効性を確認した. しかしながら, 今回は少数の問題のみしか取り扱わなかったので, より多くの数値実験を行い, 提案手法の既存の方法に対する優位性を示すことが必要であろう. また, 今回は数値実験において New+のパラメータ t_k を 1 としたが, より有効な t_k の選択法の提案は今後の課題である.

参考文献

[1] M. Al-Baali, Descent property and global convergence of the Fletcher-Reeves method with inexact line search, *IMA Journal of Numerical Analysis*, **5** (1985), 121–124.

[2] Y.H. Dai and L.Z. Liao, New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods, *Applied Mathematics and Optimization*, **43** (2001), 87-101.

[3] Y.H. Dai and Y. Yuan, A nonlinear conjugate gradient method with a strong global convergence property, *SIAM Journal on Optimization*, **10** (1999), 177–182.

[4] R. Fletcher and C.M. Reeves, Function minimization by conjugate gradients, *Computer Journal*, **7** (1964), 149–154.

[5] J.A. Ford, Y. Narushima and H. Yabe, Multi-step nonlinear conjugate gradient methods for unconstrained minimization, *Computational Optimization and Applications*, to appear.

[6] J.C. Gilbert and J. Nocedal, Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization, *SIAM Journal on Optimization*, **2** (1992), 21–42.

[7] W.W. Hager and H. Zhang, A new conjugate gradient method with guaranteed descent and an efficient line search, *SIAM Journal on Optimization*, **16** (2005), 170–192.

[8] W.W. Hager and H. Zhang, A survey of nonlinear conjugate gradient methods, *Pacific Journal of Optimization*, **2** (2006), 35–58.

[9] M.R. Hestenes and E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **49** (1952), 409–436.

[10] J.J. Moré, B.S. Garbow and K.E. Hillstrom, Testing unconstrained optimization software, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **7** (1981), 17–41.

[11] J.J. Moré and D.J. Thuente, Line search algorithms with guaranteed sufficient decrease, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **20** (1994), 286–307.

[12] J. Nocedal, http://www.ece.northwestern.edu/~nocedal/software.html

[13] J. Nocedal and S.J. Wright, Numerical Optimization, Springer Series in Operations Research, Springer Verlag, New York, 1999.

[14] M.J.D. Powell, Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method, in Lecture Notes in Mathematics, **1066**, Springer-Verlag, Berlin, 122–141, 1984.

[15] H. Yabe and N. Sakaiwa, A new nonlinear conjugate gradient method for unconstrained optimization, *Journal of the Operations Research Society of Japan*, **48** (2005), 284–296.

[16] H. Yabe and M. Takano, Global convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods with modified secant condition, *Computational Optimization and Applications*, **28** (2004), 203–225.

[17] L. Zhang, W. Zhou and D.H. Li, A descent modified Polak-Ribière-Polyak conjugate gradient method and its global convergence, *IMA Journal of Numerical Analysis*, **26** (2006), 629–640.

[18] L. Zhang, W. Zhou and D.H. Li, Global convergence of a modified Fletcher-Reeves conjugate gradient method with Armijo-type line search, *Numerische Mathematik*, **104** (2006), 561–572.

[19] G. Zoutendijk, Nonlinear programming, computational methods, in Integer and Nonlinear Programming, J. Abadie, ed., North-Holland, Amsterdam, 37–86, 1970.